

Таблица 2. Расчет по (2) свойств X-замещенных  $C_6H_6 D_{6h}$ .

| Бензол<br>$D_{6h}$ | Опыт  | Расч. | Бензол $D_{6h}$      | Опыт  | Расч. |
|--------------------|-------|-------|----------------------|-------|-------|
| $C_6H_6$           | 129,7 | 129,7 | 1,2,3- $C_6X_3$      | 124,6 | 124,6 |
| $C_6H_5X$          | 122,0 | 122,0 | 1,2,4,5-<br>$C_6X_4$ | 119,5 | 119,5 |
| пара- $C_6X_2$     | 121,1 | 121,1 | 1,2,3,5-<br>$C_6X_4$ | 118,7 | 118,7 |
| мета- $C_6X_2$     | 118,9 | 118,9 | 1,2,3,4-<br>$C_6X_4$ | 123,4 | 123,4 |
| орто- $C_6X_2$     | 122,1 | 122,1 | $C_6X_5$             | 123,3 | 123,3 |
| 1,2,4- $C_6X_3$    | 116,9 | 116,9 | $C_6X_6$             | 130,2 | 130,2 |
| 1,3,5- $C_6X_3$    | 144,7 | 144,7 |                      |       |       |

## СХЕМА ОЦЕНКИ СВОЙСТВ СТРУКТУРНЫХ X-ЗАМЕЩЕННЫХ ЭТАНА И КОЭФФИЦИЕНТЫ БИНОМА НЬЮТОНА

*Шилкина К.Д., Красноперов С.В., Нилов Д.Ю.*

Тверской государственный университет

170100, г. Тверь, ул. Желябова, д. 33

smolyakov@inbox.ru

На основе подобия подграфов в молекулярных графах (МГ) ряда молекул и разложения многоугольных чисел (треугольных, тетраэдрических и т.д.) треугольника Паскаля (биномиальных коэффициентов) для X-замещенных  $CH_{3-k}X_k-CH_{3-l}X_l$  (где X =  $CH_3, F, Cl, \dots$ , а k, l – их числа) структурных изомеров этана получены соответственно 7- и 10-константные аддитивные схемы расчета свойств изомеров замещения базисной структуры. При использовании строк треугольника Паскаля схема оценки свойства P изомеров X-замещенных молекул группы  $D_{6h}$  запишется в виде:

$$P(D_{6h}) = C_n^0 p_0 + C_n^1 p_1 + \dots + C_n^{n-1} p_{n-1} + C_n^n p_n, \quad (1)$$

где  $p_0, p_1, p_2, \dots$  – параметры, а  $C_n^0 = 1$ ,  $C_n^1 = nX$ ,  $C_n^2$ ,  $C_n^3$ ,  $C_n^4, \dots$  – треугольные ( $K_3$ ), тетраэдрические ( $K_{TЭ}$ ), арифметических рядов 5, 6 и 7 порядков. Так, при  $n = 1, 2, 3, 4, \dots$ , столбцы схемы (1) есть многоугольные числа:  $K_3 = n(n-1)/2 = 1, 3, 6, 10, \dots$ ,  $K_{TЭ} = n(n-1)(n-2)/6 = 1, 4, 10, 20, \dots$ ,  $K_5 = n(n-1)(n-2)(n-3)/24 = 1, 5, 15, 35, \dots$ ,  $K_6 = n(n-1)(n-2)(n-3)(n-4)/120 = 1, 6, 21, 56, \dots$ ,  $K_7 = n(n-1)(n-2)(n-3)(n-4)(n-5)/720 = 1, 7, 28, 84, \dots$  и т.д.

Рассмотрим числа X-замещенных  $CH_{3-k}X_k-CH_{3-l}X_l$  (где X =  $CH_3, F, Cl, \dots$ , а k, l – их числа). Выразим через степени замещения k и l числа парных и всех кратных (тройных, четверных, и т.д.) невалентных

взаимодействий скелетных атомов X-C-X, X-C(X)-X через один атом C и через два атома X-C-C-X, X-C-C-XX, XX-C-C-XX,... XXX-C-C-XXX в структурном изомере этана (см. табл.):

- 1)  $a_0 = n_{\text{C-C}} = 1$ ; 2)  $a_1 = n_{\text{X}}^{\text{C-C}} = (k+l)$ ; 3)  $a_3 = n_{\text{XX}}^{\text{C-C}} = 1/2k(k-1) + 1/2l(l-1)$ ;
- 4)  $a_2 = n_{\text{XX}}^{\text{C-C}} = (k \cdot l)$ ; 5)  $a_4 = n_{\text{XXX}}^{\text{C-C}} = 1/6k(k-1)(k-2) + 1/6l(l-1)(l-2)$ ;
- 6)  $a_5 = n_{\text{X-XX}}^{\text{C-C}} = 1/2l(l-1)k + 1/2k(k-1)l$ ; 8)  $a_7 = n_{\text{XX-XX}}^{\text{C-C}} = 1/4k \cdot (k-1) \cdot l \cdot (l-1)$
- 7)  $a_6 = n_{\text{X-XXX}}^{\text{C-C}} = 1/6 \cdot k \cdot l \cdot (l-1)(l-2) + 1/6 \cdot k \cdot l \cdot (k-1)(k-2)$  (2)
- 9)  $a_8 = n_{\text{XX-XXX}}^{\text{C-C}} = 1/12k \cdot (k-1) \cdot l \cdot (l-1)(l-2) + 1/12 \cdot l \cdot (l-1) \cdot k \cdot (k-1)(k-2)$
- 10)  $a_9 = n_{\text{XXX-XXX}}^{\text{C-C}} = 1/36 \cdot k \cdot (k-1)(k-2) \cdot l \cdot (l-1)(l-2)$ .

Таблица 1. Расчетная схема оценки свойства  $P$  структурных изомеров X-замещенных этана ( $X = \text{CH}_3$ ) в разных приближениях.

| Граф X зам.<br>этана              | $a_0$ | n     |       | $K_3$ |       | $K_{T3}$ |       | $K_5$ |       | $K_6$ | $K_7$ | $2^n$ |
|-----------------------------------|-------|-------|-------|-------|-------|----------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
|                                   |       | $a_1$ | $a_2$ | $a_3$ | $a_4$ | $a_5$    | $a_6$ | $a_7$ | $a_8$ | $a_9$ |       |       |
| $\text{CH}_3\text{CH}_3$          | 1     | 0     | 0     | 0     | 0     | 0        | 0     | 0     | 0     | 0     | 0     | 1     |
| $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{X}$  | 1     | 1     | 0     | 0     | 0     | 0        | 0     | 0     | 0     | 0     | 0     | 2     |
| $\text{CH}_3\text{CHX}_2$         | 1     | 2     | 1     | 0     | 0     | 0        | 0     | 0     | 0     | 0     | 0     | 4     |
| $\text{CH}_2\text{XCH}_2\text{X}$ | 1     | 2     | 0     | 1     | 0     | 0        | 0     | 0     | 0     | 0     | 0     | 4     |
| $\text{CH}_3\text{CX}_3$          | 1     | 3     | 3     | 0     | 1     | 0        | 0     | 0     | 0     | 0     | 0     | 8     |
| $\text{CH}_2\text{XCHX}_2$        | 1     | 3     | 1     | 2     | 0     | 1        | 0     | 0     | 0     | 0     | 0     | 8     |
| $\text{CH}_2\text{XCX}_3$         | 1     | 4     | 3     | 3     | 1     | 3        | 1     | 0     | 0     | 0     | 0     | 16    |
| $\text{CHX}_2\text{CHX}_2$        | 1     | 4     | 2     | 4     | 0     | 4        | 0     | 1     | 0     | 0     | 0     | 16    |
| $\text{CHX}_2\text{CX}_3$         | 1     | 5     | 4     | 6     | 1     | 9        | 2     | 3     | 1     | 0     | 0     | 32    |
| $\text{CX}_3\text{CX}_3$          | 1     | 6     | 6     | 9     | 2     | 18       | 6     | 9     | 6     | 1     | 0     | 64    |

Схема (5) уже различает структурные изомеры ряда X-замещенных этана.

$$P = n_0 \square_0 + n_1 \square_1 + n_2 \square_2 + \dots + n_9 \square_9, \quad (5)$$

1. Нилов Д.Ю., Смоляков В.М. / Схема оценки свойств структурных X-замещенных этана и коэффициенты бинома Ньютона. // Тез. докл. Всерос. молодеж. конф. «Инновации в химии: достижения и перспективы». Казань. 29-30 сентября 2011. С. 48-51.